

ЦКП «Сибирский суперкомпьютерный центр» и лаборатория Суперкомпьютерного моделирования ИВМиМГ СО РАН

*М.А. Марченко, Б.М. Глинский, И.Г. Черных
Институт Вычислительной Математики и
Математической Геофизики СО РАН*

SSCC HARDWARE 2021

NKS-1P (RSC, hot water cooling, 2448 cores, ~182TFLOPS Rpeak):

- 27 nodes: 2 CPU Intel Xeon E5-2697v4 [128 GB DDR4, 256 GB DDR4] (864 cores, 2.6GHz) (1 узел 2x375GB Intel Optane [IMDT])
- 16 nodes: 1 CPU Intel Xeon Phi 7290 KNL [16 GB MCDRAM+96 GB DDR4] (1152 cores, 1.5-1.7 GHz)
- 1 node: 2 CPU Intel Xeon Platinum 8268 [192 GB DDR4] (48 cores, 2.9 GHz)
- 8 nodes: 2 CPU Intel Xeon Gold 6248R [192/384/768 GB DDR4] (384 cores, 2.9 GHz)
- Intel OmniPath 100 Gb/s
- Intel Lustre – 200 TB + NFS 100TB(ИГил СО РАН)

NKS-30T (HP, air cooling, ~1500 CPU cores (2.9GHz), ~30000 GPU cores, 85ТФЛОПС (сегмент с GPU) + 22ТФЛОПС (сегмент CPU)):

- 576 CPU Intel Xeon E5450/E5540(2688 cores)
- 80 CPU Intel Xeon X5670(480 cores)
- 120 GPU NVIDIA Tesla M 2090(61440 cores)
- Infiniband QDR 40 Gb/s
- HP Ibrix – 90 TB



ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Коммерческие и свободно-распространяемые программные пакеты

Газовая динамика:	ANSYS (Fluent) 14.5
Квантовая химия:	GAUSSIAN 09, QUANTUM ESPRESSO 6.1, NWCHEM
Молекулярная динамика:	GROMACS 4.6, NAMD 2.12

Программные пакеты, разработанные в ИВМиМГ СО РАН

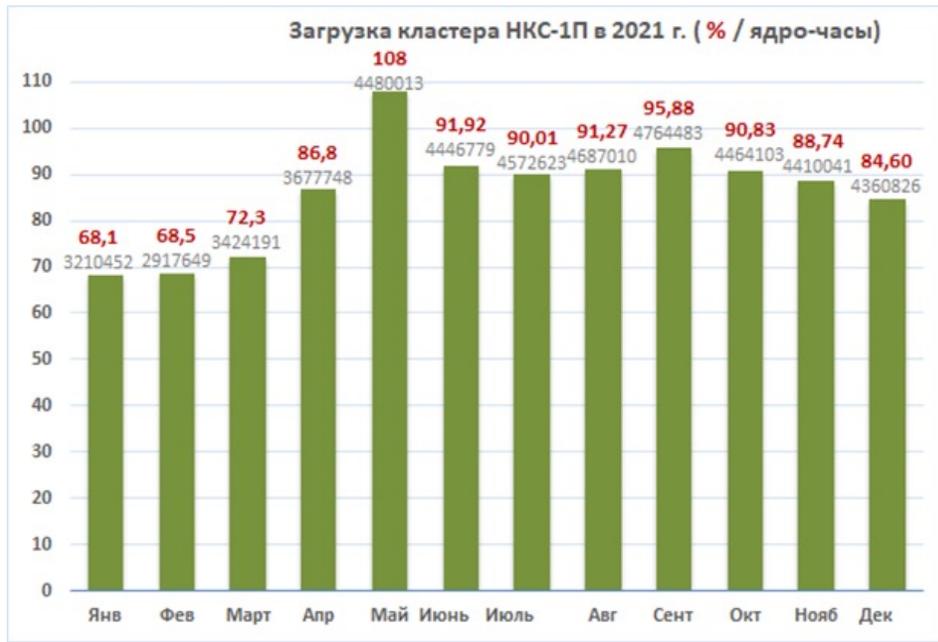
Распределенное статистическое моделирование:	PARMONC (Марченко М.А.)
Среда имитационного моделирования:	AGNES (Родионов А.С.)
Химическая кинетика и фармакокинетика:	ChemPAK (Черных И.Г.)
Нелинейные упруго-пластические деформации:	ELAST2D (Куликов И.М.)
Астрофизика:	AstroPhi (Куликов И.М.)

РОСТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ ЦКП ССКЦ ИВМиМГ СО РАН

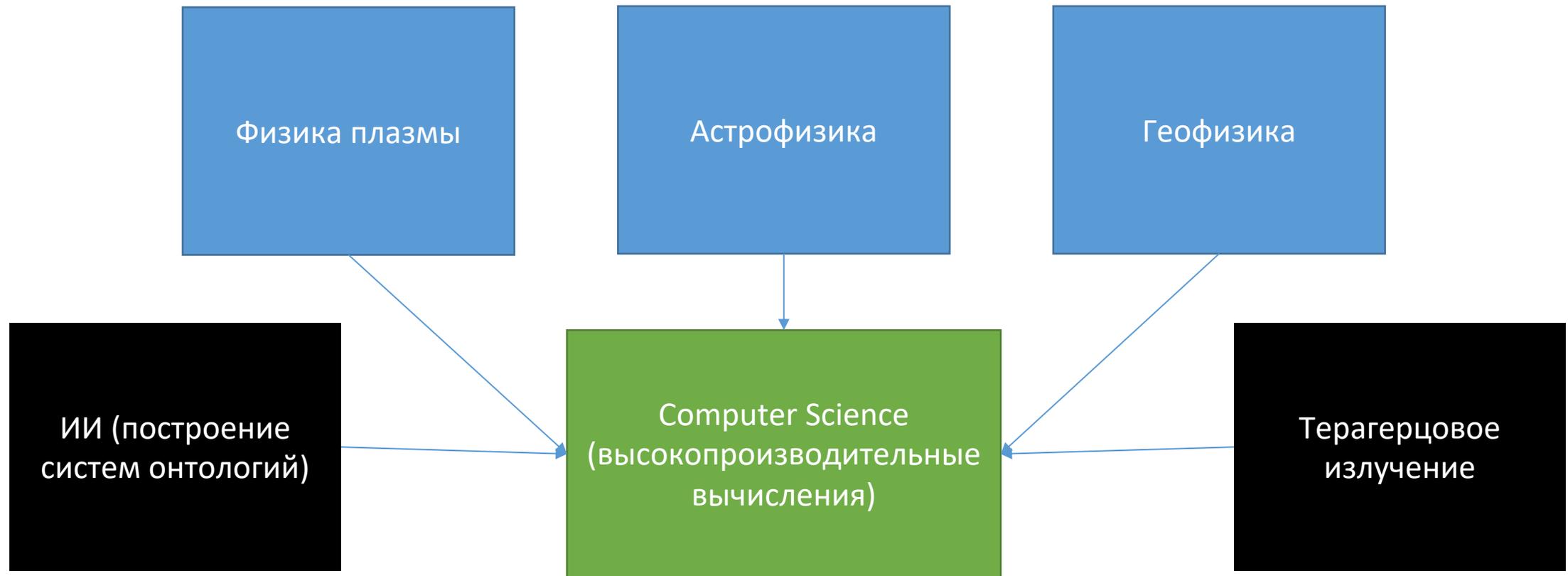


36 место, топ50 СНГ

Загрузка ресурсов ЦКП ССКЦ ИВМиМГ СО РАН в 2021 г.



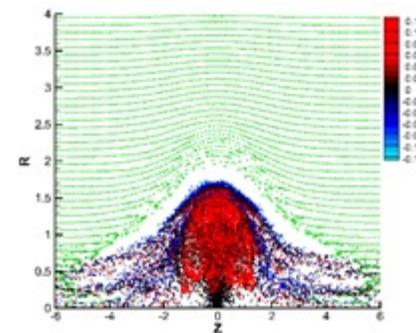
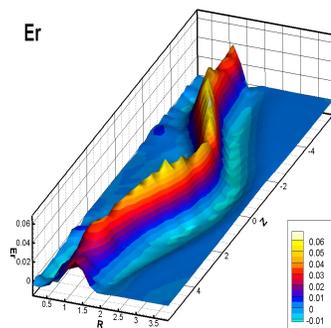
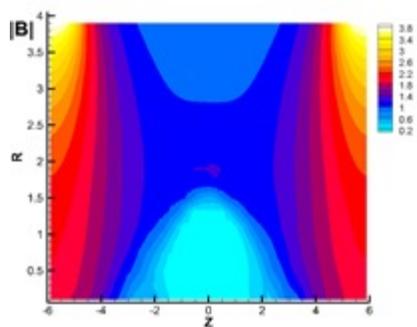
Структура выполненных НИР в 2021 году



Высокопроизводительная вычислительная модель плазменных течений в открытых ловушках в режиме диамагнитного удержания

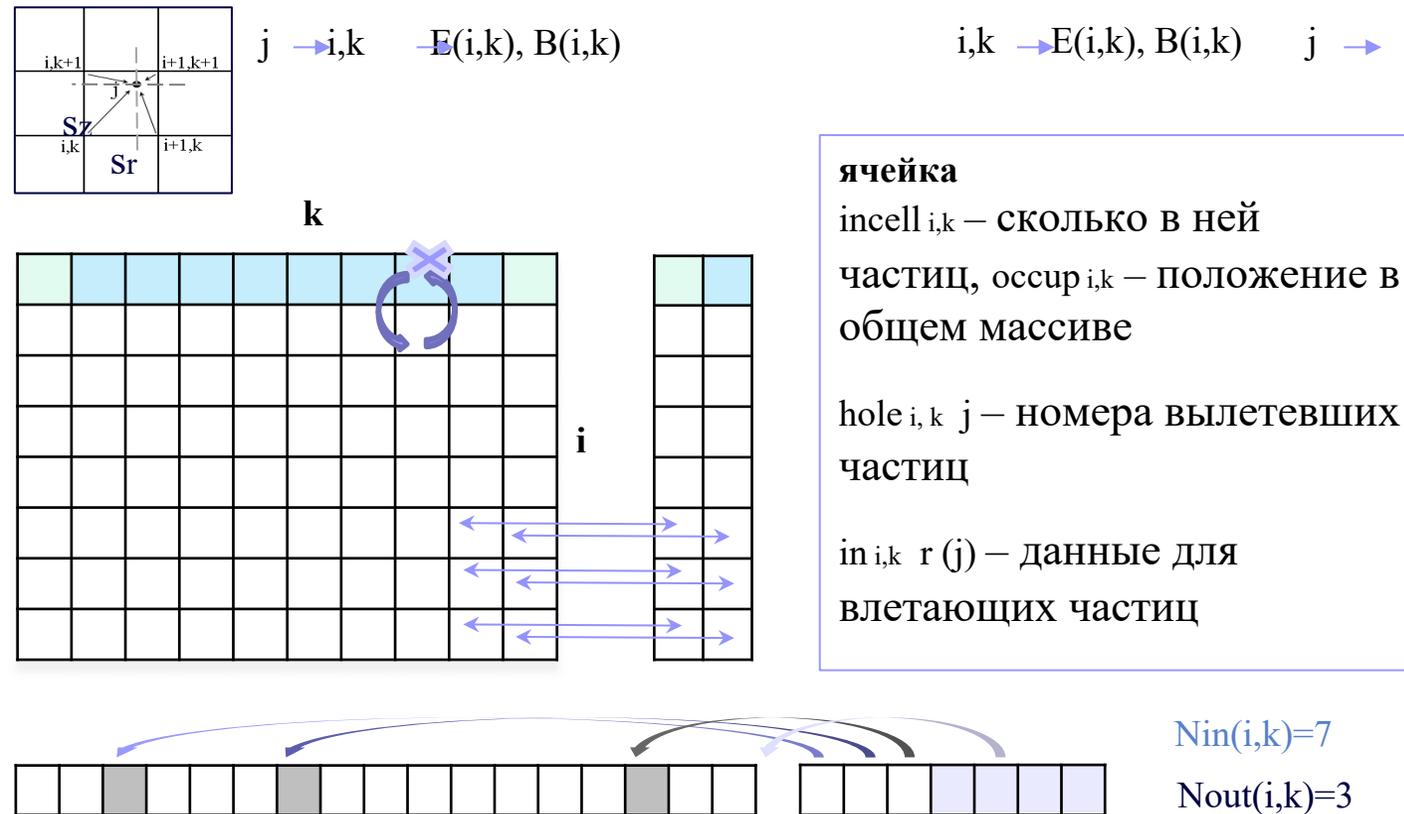
Вшивков В.А., Дудникова Г.И., Боронина М.А., Генрих Е.А.

Создана численная модель удержания и нагрева плазмы в осесимметричной открытой магнитной ловушке для установок УТС. Гибридная модель с использованием метода частиц в ячейках основана на кинетическом приближении для ионных компонент фоновой плазмы и инжектируемого пучка и МГД приближении для электронной компоненты. Создан комплекс программ для проведения численного моделирования диамагнитного режима ловушки, эксперименты по исследованию которого планируются на установке КОТ (ИЯФ СО РАН). Проведены вычислительные эксперименты по исследованию эволюции структуры магнитного поля и плазмы, получены временные и пространственные характеристики фоновой и удерживаемой плазмы в зависимости от энергии, тока и ионного состава инжектируемого пучка и других параметров.



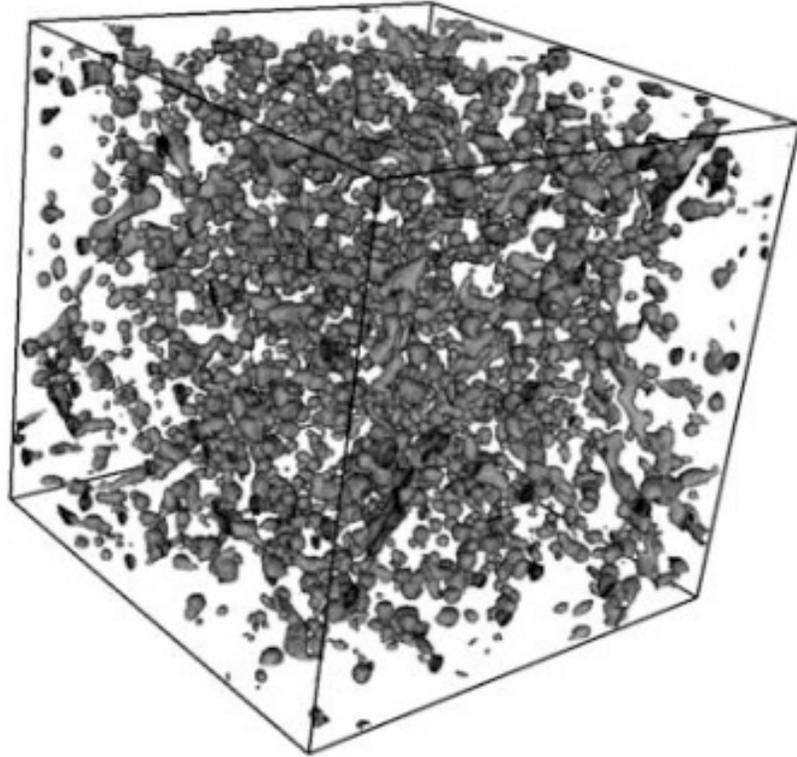
Разработка численных методов и параллельных алгоритмов для моделирования динамики плазмы в диаманнитном режиме в открытой магнитной ловушке:

- ✓ Разработка алгоритма процедур вычисления координат и скоростей частиц для автоматической векторизации компилятором, то есть применение одной операции к нескольким данным одновременно, позволяющее использовать процессоры в интенсивном режиме и улучшить производительность кода; включает в себя модификацию последовательности циклов для обработки частиц, реорганизацию хранения данных частиц с учетом их сортировки по ячейкам, изменение процедуры задания координат фона, инжекции частиц и граничных условий.
- ✓ Разработка алгоритма учета времени инжекции частиц
- ✓ Пост-обработка массивов данных для частиц в целью диагностики

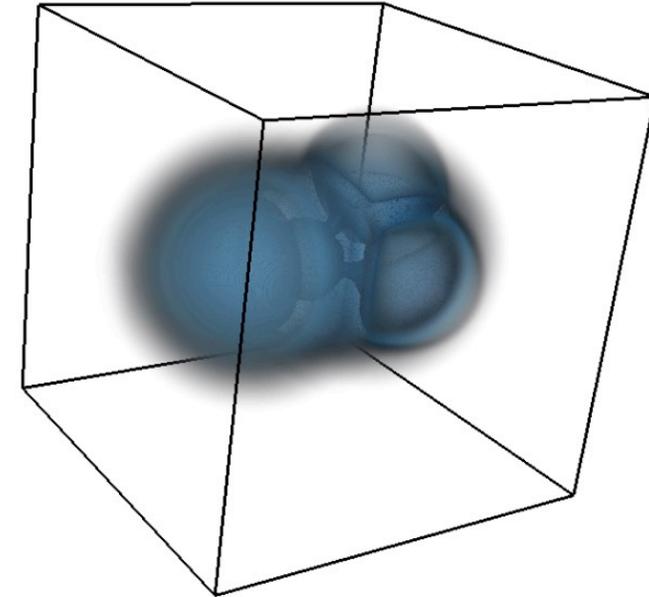


- М.А. Боронина, В.А. Вшивков, С.Е. Киреев *Вестник НГУ. Серия: Информационные технологии*. 2021 Т.19, №1. С. 15–25. DOI: 10.25205/1818-7900-2021-19-1-15-25
- М. А. Boronina, I. G. Chernykh, G. I. Dudnikova, V. A. Vshivkov. Numerical modelling of open magnetic trap using parallel computers // Marchuk Scientific Readings-2021: Abstracts of the Intern. conf., October 4–8, 2021 / Institute of comput. mathematics and mat. geophysics SB RAS. DOI: 10.24412/cl-35065-2021-1-01-66

Новые сценарии взрыва сверхновых SNeIa/Iax



Построена подсеточная модель горения материала белых карликов и взрыва сверхновых типа Ia/Iax



Экспериментально показана «нестандартность» взрыва сверхновых типа Ia/Iax

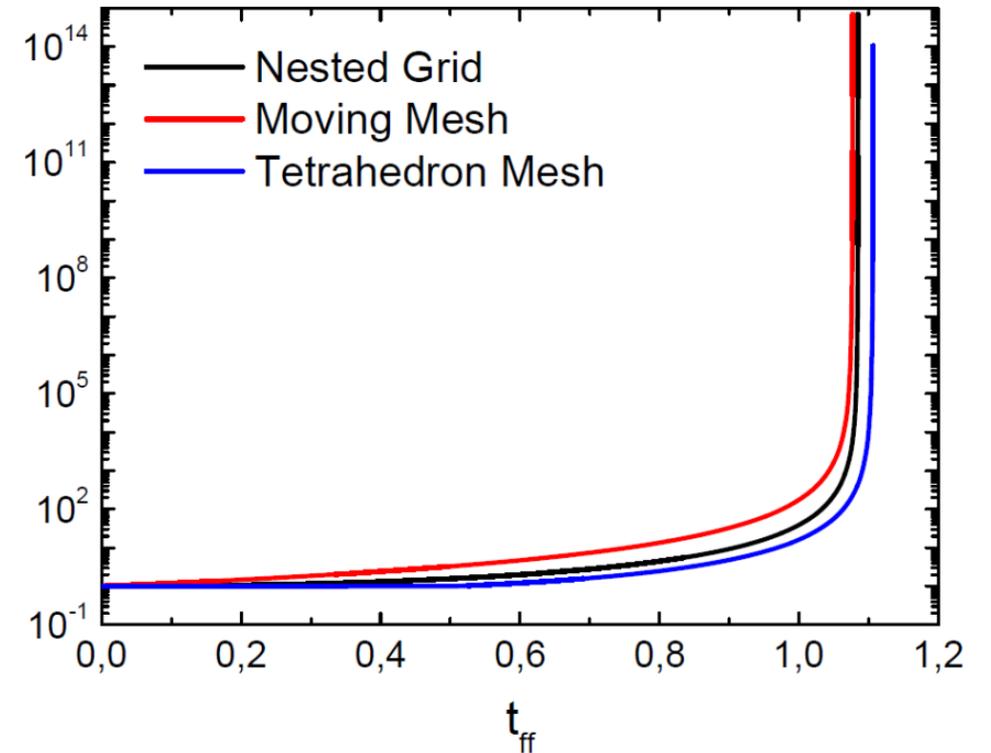
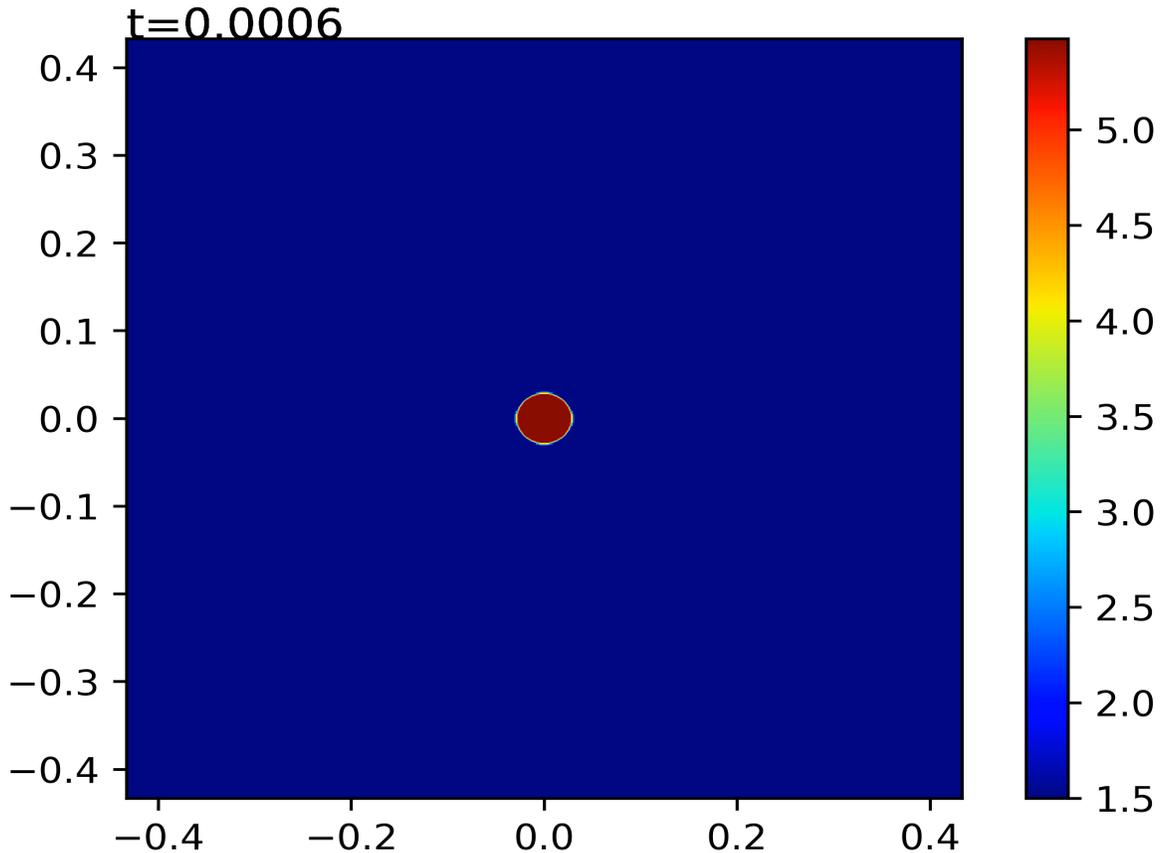
Процессы звездообразования

Вложенные
сетки

Тетраэдральные
сетки

Подвижные
сетки

Использование различных сеток



С помощью сеточных
методов смоделирован
процесс коллапса облаков
до звездной плотности

Fourth Virtual Workshop on Numerical Modeling in MHD and Plasma Physics: Methods, Tools, and Outcomes. Virtual, October 12-14, 2021

Zoom Конференция

Вид

Бочев Михаил

Igor Kulikov

Жуков

Андрей Николаевич Коз...

Valery Goryachev

Veronika Bogomazova

Владимир Лукин

Aleksey Tayurskiy

Ilya Kondratyev

Вшивков Виталий Андре...

Берендеев Евгений Анд...

Konstantin Vshivkov

serge

Vika Gatsuk

Boronina Marina

Анна Ефимова

Tarasov

Galina Levina

Alexander Suda...

Владислав Измоменов

Egor Godenko

Выключить звук

Остановить видео

Безопасность

Участники 21

Чат

Демонстрация экрана

Запись

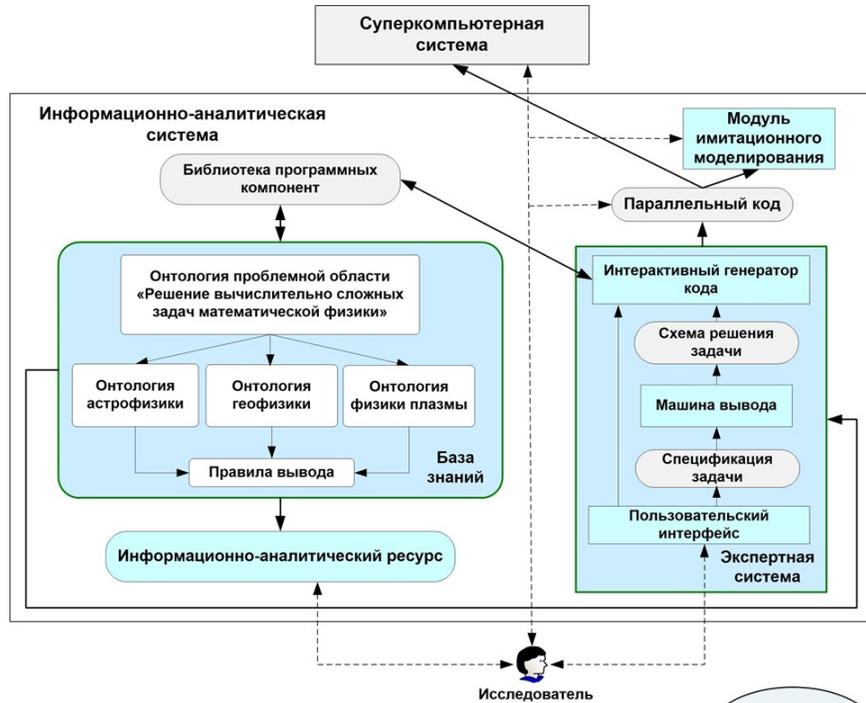
Реакции

Завершение

Интеллектуальная поддержка решения вычислительно сложных задач

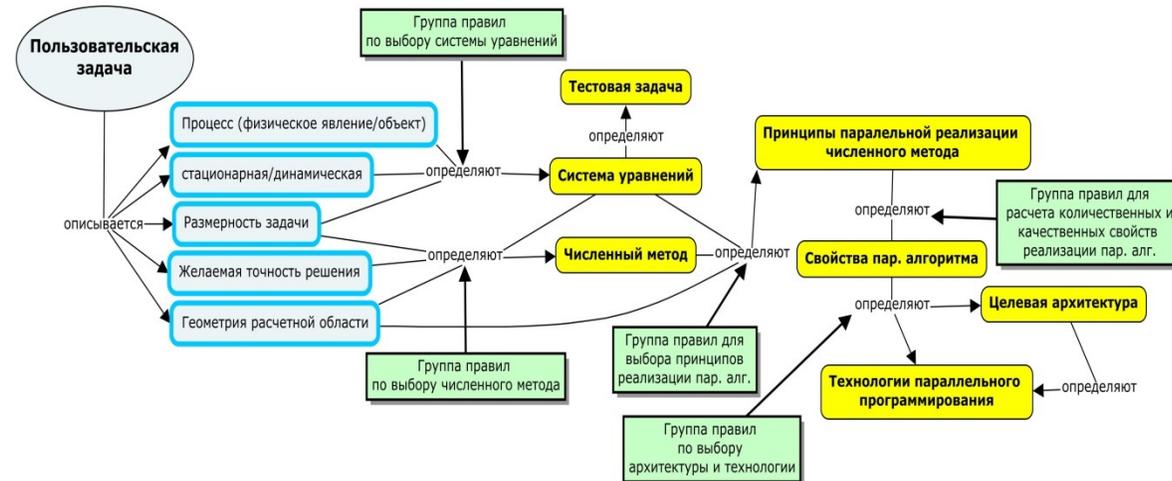
совместно с ИСИ СО РАН

Б.М. Глинский, А.Ф. Сапетина



Разработана концепция интеллектуальной поддержки решения вычислительно сложных задач математической физики на суперкомпьютерах, основанная на онтологическом представлении информации. Онтология математических методов и параллельных алгоритмов и онтология параллельных архитектур и технологий совместно с правилами вывода, сформулированными экспертами в заданной предметной области, позволяют подобрать эффективный численный метод, параллельный алгоритм и вычислительную архитектуру для решения задачи пользователя. Разработанная система прошла успешную апробацию на задачах астрофизики, физики плазмы и геофизики.

Основа для написания гранта РФФ на 2023 год. Рабочее название: Создание искусственного интеллекта для решения вычислительно сложных задач математической физики на суперкомпьютерах с использованием экспертных знаний (на примере ...)



Вибросейсмический мониторинг вулканов

Б.М. Глинский, А.Ф. Сапетина

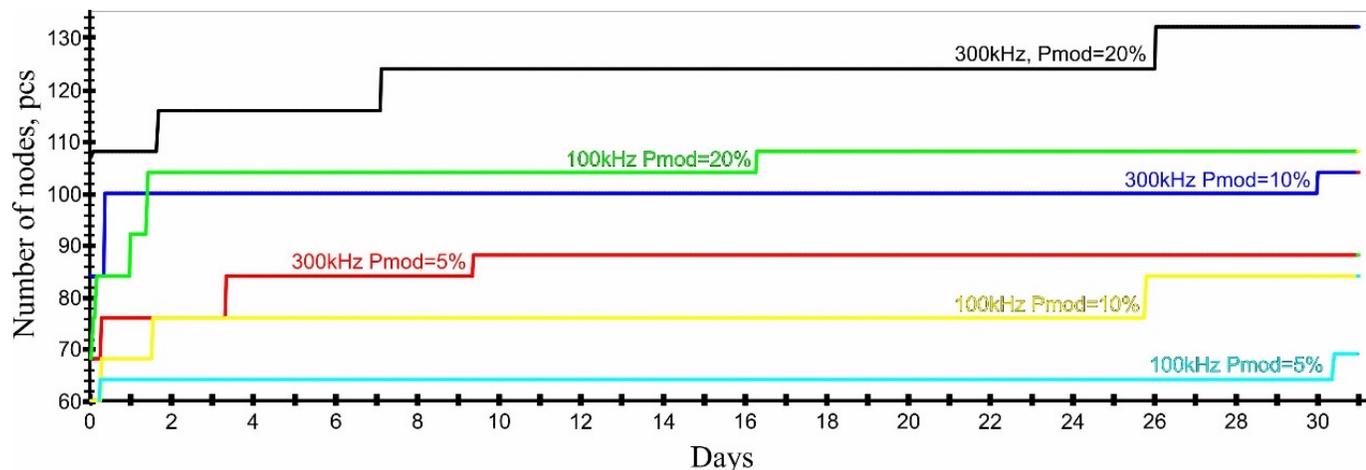
- Предложен и обоснован метод мониторинга грязевых и магматических вулканов с применением мощных вибросейсмических источников. Проведенные ранее экспериментальные работы на грязевых вулканах Таманской грязевулканической провинции и численные эксперименты показывают принципиальную возможность активного мониторинга вулканов.
- На основе проведенного анализа выбраны перспективные подходы к построению более реалистичных численных моделей, учитывающие вязко-упругую природу вулканических магм и диффузную границу перехода между магмой и твёрдыми породами.

1. Сапетина А.Ф., Глинский Б.М., Мартынов В.Н. Моделирование активного вибропросвечивания вулканической постройки для оценки возможности проведения мониторинга // Проблемы комплексного геофизического мониторинга сейсмоактивных регионов.: Труды Восьмой Всероссийской научно-технической конференции с международным участием. Петропавловск-Камчатский. 26 сентября– 2 октября 2021 г

2. Sapetina A. F., Glinskiy B. M., Martynov V. N. Numerical modeling results for vibroseismic monitoring of volcanic structures with different shape of the magma chamber // J. of Phys.: Conf. Ser. 2021. V. 1715

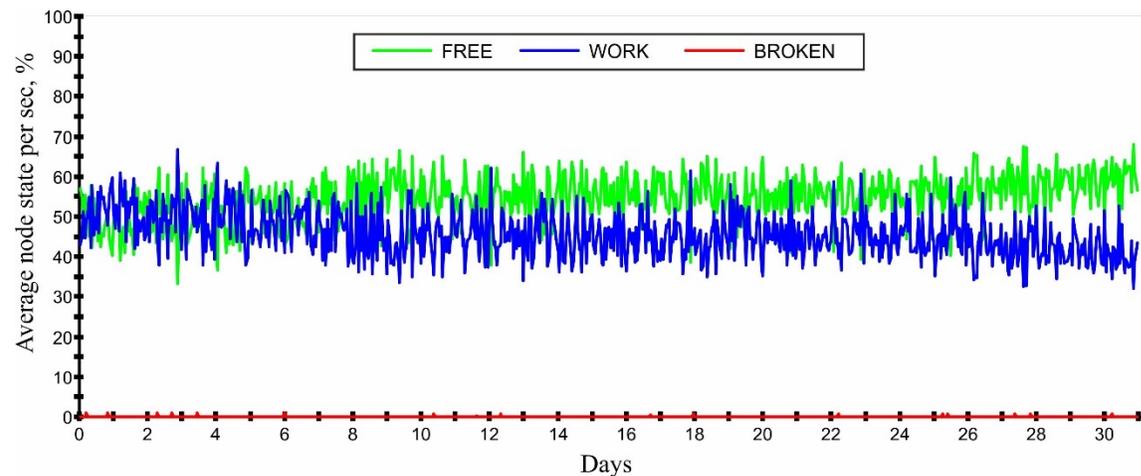
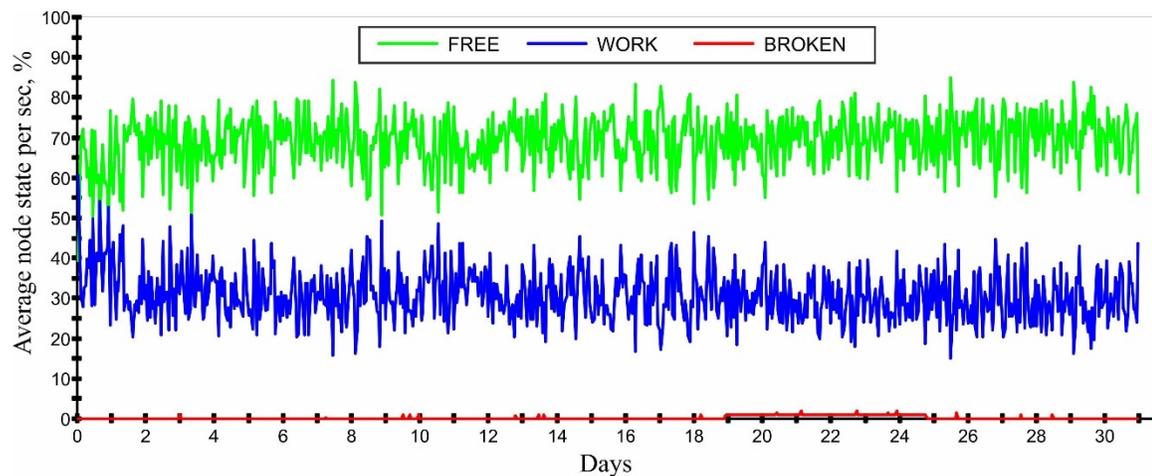
ВИНС Д.В. Полномасштабное моделирование вычислительной инфраструктуры. Оценка максимального количества узлов.

Changing the number of nodes (depending on the operating mode)

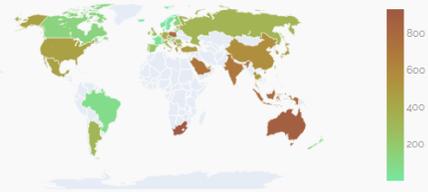


100kHz operating mode, $P_{mod} = 20\%$

300kHz operating mode, $P_{mod} = 20\%$



Carbon Intensity across the world



About CO2e

'Carbon dioxide equivalent' (CO2e) measures the global warming potential of a mixture of greenhouse gases. **It represents the quantity of CO2 that would have the same impact on global warming** as the mix of interest and is used as a standardised unit to assess the environmental impact of human activities.

What is a tree-month?

It's the amount of CO2 sequestered by a tree in a month. **We use it to measure how long it would take to a mature tree to absorb the CO2 emitted by an algorithm.** We use the value of 11 kg CO2/year, which is roughly 1kg CO2/month.

What can you do about it?

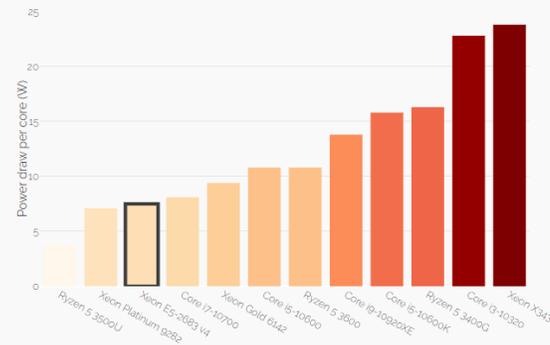
The main factor impacting your footprint is the location of your servers: the same algorithm will emit **74 times more** CO2e if ran in Australia compared to Switzerland. Although it's not always the case, many cloud providers offer the option to select a data centre.

Memory power draw is a huge source of waste, because **the energy consumption depends on the memory available, not the actual usage**, only requesting the needed memory is a painless way to reduce greenhouse gas emissions.

Generally, taking the time to write optimised code that runs faster with fewer resources saves both money and the planet.

And above all, **only run jobs that you need!**

Power draw of different processors



The formula

The carbon footprint is calculated by estimating the energy draw of the algorithm and the carbon intensity of producing this energy at a given location:

$$\text{carbon footprint} = \text{energy needed} * \text{carbon intensity}$$

Where the energy needed is:

$$\text{runtime} * (\text{power draw for cores} * \text{usage} + \text{power draw for memory}) * \text{PUE} * \text{PSF}$$

The power draw for the computing cores depends on the model and number of cores, while the memory power draw only depends on the size of memory available. The usage factor corrects for the real core usage (default is 1, i.e. full usage). The PUE (Power Usage Effectiveness) measures how much extra energy is needed to operate the data centre (cooling, lighting etc). The PSF (Pragmatic Scaling Factor) is used to take into account multiple identical runs (e.g. for testing or optimisation).

The Carbon Intensity depends on the location and the technologies used to produce electricity. But note that **the "energy needed" indicated at the top of this page is independent of the location.**

How to report it?

It's important to track the impact of computational research on climate change in order to stimulate greener algorithms. For that, **we believe that the carbon footprint of a project should be reported on publications alongside other performance metrics**.

Here is a text you can include in your paper:

This algorithm runs in 12h on 12 CPUs Xeon E5-2683 v4, and draws 2.28 kWh. Based in Austria, this has a carbon footprint of 303.10 g CO2e, which is equivalent to 0.33 tree-months (calculated using green-algorithms.org v2.1 [1]).

[1] Lannelongue, L., Grealey, J., Inouye, M., Green Algorithms: Quantifying the Carbon Footprint of Computation. Adv. Sci. 2021, 2100707.

Including the version of the tool is useful to keep track of the version of the data used.

**Спасибо
за
внимание!**